

平成 30 年度 利用報告書
光メタマテリアルの電磁場解析

○田中拓男(1,2)

(1) 開拓研究本部 田中メタマテリアル研究室

(2) 光量子工学研究領域 フォトン操作機能研究チーム

1. 本課題の研究の背景、目的

光メタマテリアルと呼ばれる波長よりも細かな人工構造を用いて物質の光学特性を制御する疑似光学材料について研究を行っている。メタマテリアルの構造は微細なため、その構造の設計や特性評価を行うためには大規模な電磁気学計算が必要である。特に最近では、立体的な共振器構造を持ち、その光学特性が光の入射角度に依存しないメタマテリアルや、金ナノ微粒子を自己組織的に結合させて作製したメタマテリアルを開発しているが、これらは立体的かつナノメートルスケールの極微細構造を持つため、その計算機モデルは大規模なものとなる。さらに波長領域においても赤外から紫外域の広い波長範囲にわたってその分光特性を計算する必要があるため、結果として高い計算性能を持った計算機が必要である。このような背景のもと、今年度は、複数の金ナノ微粒子がポリスチレン球の表面にクラスター状に配置された構造の光学特性について、分割双極子近似法 (Discrete dipole approximation: DDA) を利用した数値解析を実施した。

2. 具体的な利用内容、計算方法

直径 170~250nm のポリスチレンコア粒子の表面に、直径 20nm の金ナノ微粒子がナノギャップを隔てて無数に配置された金ナノ微粒子クラスターの光学特性を、DDA 法を用いた電磁界解析ソフトウェア (DDSCAT) を利用して計算した。1つ1つの金ナノ粒子を 800 点ほどの双極子で近似した大規模モデルを作り、その光学特性を紫外光から近赤外光までの波長 300nm~1000nm の範囲で計算した。コア粒子のサイズや、入射光の偏光方向を変えながら計算を行い、光反射・吸収スペクトルに加えて、金ナノ微粒子クラスター近傍の電磁場分布についても計算した。

計算モデルの大規模化に伴い、必要となるメモリや計算時間が大幅に大きくなったため、各波長毎の計算を個別のジョブとして投入し、並列に計算を行うことで、効率良いシミュレーションが行えた。

3. 結果

まだ計算途中のものもあるため、最終的な結果は評価できていないが、金ナノ粒子クラスターでは、複数の金ナノ微粒子に磁気ダイポールモードの局在プラズモン共鳴場が励起されることが明らかになった。この結果から、金ナノ粒子クラスターを用いたメタマテリアルが磁気共鳴を示し、実効的な透磁率が変化する事を明らかにできた。

計算結果は、実験で試作した金ナノ微粒子クラスターの吸収スペクトルとの整合性も高く、精度の良い結果が得られていることがわかった。また、コア粒子径が 210nm の金ナノ微粒子クラスターにおいては、波長 748nm の入射光に対して、非常に強い磁気共鳴を起こすことが計算結果から明らかになった。この共鳴現象を実験的に確認すべく、波長可変レーザーを用いた実験システムを構築している。

また、共鳴状態の構造体近傍の電場分布を解析することで、光電場が局在している所謂ホットスポットの分布等を明らかにすることができた。

また、他のコア粒子径の構造についても、共鳴波長付近をさらに詳しく計算することで、同様の共鳴現象の可視化とその光学的特性を明らかにすることができた。

4. まとめ

DDA 法を用いた大規模計算により、複数の金ナノ微粒子がクラスター状に配置された高次構造体の光学特性を高い精度で計算できること、通常では測定できない構造体近傍の電場分布を可視化できることが明らかになった。同時に、これ以上の計算モデルの大規模化は、簡易利用の計算機資源では難しい事も明らかになった。

5. 今後の計画・展望

ひきつづき、複数の金ナノ粒子が結合した金ナノ微粒子クラスター構造について、その偏光依存性や、複数の微粒子クラスターが違いに相互作用した場合の光学特性について解説を行う予定である。